秩序形成の理論 : ミクロとマクロ(秩序形成の初期過程におけるスケーリング則と非平衡熱力学,研究会報告)

鈴木, 増雄

秩序形成の理論（ミクロとマクロ）

東大理　鈴木増雄

巨視的秩序形成の統計力学的研究をレビューし、実験との関係を議論する。　新しく、マルチスケーリング則（multi − scaling law）を提唱する。

1、はじめに

平衡系においてもゆらぎは基本的な役割を果している。　系がマクロ変数 x をとる確率 $P(x)$ は、x を指定したときのエントロピー $S(x)$ を用いて、

$$P(x) \sim \exp(S(x)/k_B) \qquad (1.1)$$

と表わされることはよく知られている。　非平衡系においても同様に、時刻 t において、x の実現する確率 $P(x,t)$ は、系の大きさ（粒子数または体積）を Ω として、

$$P(x,t) \sim \exp(\Omega \varphi(x,t)) \qquad (1.2)$$

と一般に表わされる。　この久保の仮説を用いると、（1、1）に対して Einstein が平衡系でゆらぎの議論をしたのと同様に、$\varphi(x,t)$ を最大にする x の値 $y(t)$ のまわりに展開して

$$\varphi(x,t) = -\frac{(x-y(t))^2}{2\sigma(t)} + \cdots\cdots \qquad (1.3)$$

とおくことによって、系の非平衡系でのゆらぎが記述できる。[1)〜3)]　すなわち、$y(t)$ は x の最確値を与え、$\sigma(t)$ は、そのまわりの x のゆらぎの時間変化を表わす。（1、3）を（1、2）に代入すると、

$$P(x,t) \sim \exp\left[-\frac{(x-y(t))^2}{2\varepsilon\sigma(t)}\right];\ \varepsilon = \frac{1}{\Omega}, \qquad (1.4)$$

となり、$\sigma(t)$ が有限で、Ω が大きいときは、（1.3）の展開の高次は効かない。

この方法を使うとき、もとのマクロ変数 x そのものを用いるより、適当に x の非線型変換 $z = z(x)$ を用いて、新しい変数 z に関して

$$P(x,t) \sim \frac{dz}{dx} \exp\left[-\frac{(z(x)-z(y(t)))^2}{2\varepsilon\sigma(t)}\right] \qquad (1.5)$$

とガウス近似する方が、多くの場合、より広い領域で近似がよくなる。[4)]　最近の甲斐[5)]の液晶の秩序形成ではゆらぎが秩序パラメータ x に関して非対称になっているが、これは z に関してガウシャンの分布を、もとの x の座標に直したために現れる非対称性による部分もあると思われる。　実際、甲斐[5)]も指摘している通り、初期領域では、$P(x,t)$ は

相当広領域で対数正規分布になっているが、これは、$z = \log x$ の座標では正規分布であり、もとの方程式をz座標でみたとき、近似的に線型化されることを意味している。

このように、どの座標系で線型化するかは、その系の特徴を引き出すのに決定的に重要である。過渡現象のスケーリング理論[6)～9)]も結局、この点に大きく関連している。

2. 一様な系のスケーリング理論

ここでは、一様な系での過渡現象のスケーリング理論を少し新しい見方[4)]でまとめておきたい。

不安定点近傍からの緩和に対しては、秩序パラメータxは、次のようなスケーリング形をとる[6)～9)]：

$$\langle x^2(t)\rangle \simeq \langle x^2\rangle_{st}\, f^{(sc)}(\tau). \tag{2.1}$$

但し、τは、時間t，ノイズの強さε，x(0)の不安定点（それを0とする）からのずれ $\delta(=x(0))$ の適当な関数である：

$$\tau = \tau(t,\varepsilon,\delta). \tag{2.2}$$

系の growing rate がγであれば、通常、これは、

$$\tau = \tilde{\varepsilon}(\varepsilon,\delta)e^{2\gamma t} \tag{2.3}$$

と表わされ、τはスケーリング変数と呼ばれる。[6)～9)] 現象ごとにスケーリング関数 $f^{(sc)}(\tau)$ が普遍的に決まる。逆に、このスケーリング関数の違いによって、秩序形成のタイプ、すなわち、普遍性のクラス（universality class）が分類されることになる。

スケーリング理論の利点は、いろいろ違ったεやδの値に対しても、τが不変になるように、時間を適当に変換（シフト）してやれば、同一の現象では、たった一つの普遍的な曲線によって、ゆらぎまたは秩序形成の様子が記述されることにある。

乱れた状態から、秩序状態に移る過程は秩序パラメータのモーメント $\langle x^2\rangle$ がミクロからマクロのオーダーに移り変る過程として捉えることができる。その特徴的な時間をオンセットタイムと呼び、[6)] t_0 と書くと、それは、(2.1)からわかるように、$\tau(t_0)\simeq 1$ によって決められる。すなわち、(2.3)より

$$t_0 = \frac{1}{2\gamma}\log\left[\tilde{\varepsilon}(\varepsilon,\delta)\right]^{-1} \tag{2.4}$$

となる。一般に、$\tilde{\varepsilon}(\varepsilon,\delta)$ は、ε，δが小さくなるほど小さくなるので、それに応じて、t_0 は長くなることがわかる。具体的に $\tilde{\varepsilon}(\varepsilon,\delta)$ の形や $f^{(sc)}(\tau)$ を求めるには、具体的（現象論でよい）な式から出発しなければならない。例えば、次のよう非線型のランジュバン方程式から出発すると便利である。

$$\frac{dx}{dt} = F(x, \eta(t)) . \quad (2.5)$$

但し、$\eta(t)$ はノイズである。その強さを$\sqrt{\varepsilon}$とする。さて、このとき、筆者の提唱した漸近評価法は、次のスケーリング極限をとることである：

$$\text{sc-}\lim \equiv \lim_{t\to\infty} \lim_{\varepsilon\to 0,\ \tau=\text{fixed}} . \quad (2.6)$$

この極限で、秩序形成の過程はスケーリング変数τのみの関数として表現される。

スケーリング関数の直観的な求め方は次の通りである。[4)]

i) <u>第1段階：</u> (2.5)を線型化する：

$$\frac{d}{dt} x_l(t) = F_l(x_l(t), \eta(t)) . \quad (2.7)$$

この解から、時刻tにおけるx_lの分布関数 $P_l(x_l, t)$ を求める。

ii) <u>第2段階：</u> (2.5)で$\eta(t)\equiv 0$ すなわち、$\varepsilon = 0$ とした決定論的方程式

$$\frac{d}{dt} x(t) = F(x(t), 0) \quad (2.8)$$

を初期値$x(0)$の関数として解き、その解を $x(t) = G(t, x(0))$ とする。

iii) <u>第3段階：</u> $G(t, x(0))$を、(2.8)の線型化された方程式 $dx_l(t)/dt = \gamma x_l(t)$ の解$x_l(t) = x(0)e^{\gamma t}$ の関数として、tが大きいときに、漸近的に表わす：

$$G(t, x(0)) \simeq H(x_l(t)) . \quad (2.9)$$

iv) <u>第4段階：</u> $\eta(t) \neq 0$ のときの(2.5)の解$x(t)$は、$H(x_l(t))$によって表わされ、$x_l(t)$は、(2.7)で線型近似の分布関数 $P_l(x_l, t)$に従うとして、

$$\langle x^2(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} H^2(x) P_l(x, t)\, dx \quad (2.10)$$

によって表わす。(2.6)のスケーリング極限では、これは厳密に正しいことが示されている。[6)〜10)]

今までは、この証明は、$\eta(t)$がガウシャンでホワイトのときにのみ、いろいろな方式で詳しく行われてきたが、最近、我々[10)]によって、全く一般の相関をもつガウシャンノイズに対して、特異摂動法の無限次までを調べることによって、(2.10)のスケーリング形は正しいことが証明された。[10)]

次のような具体的なモデル

$$\frac{dx}{dt} = \gamma x - g x^3 + \eta(t) \quad (2.11)$$

に対しては、$f^{(sc)}(\tau)$が解析的に与えられ、t_0の表式も求められているが、これらは、文献6)〜10)に譲る。

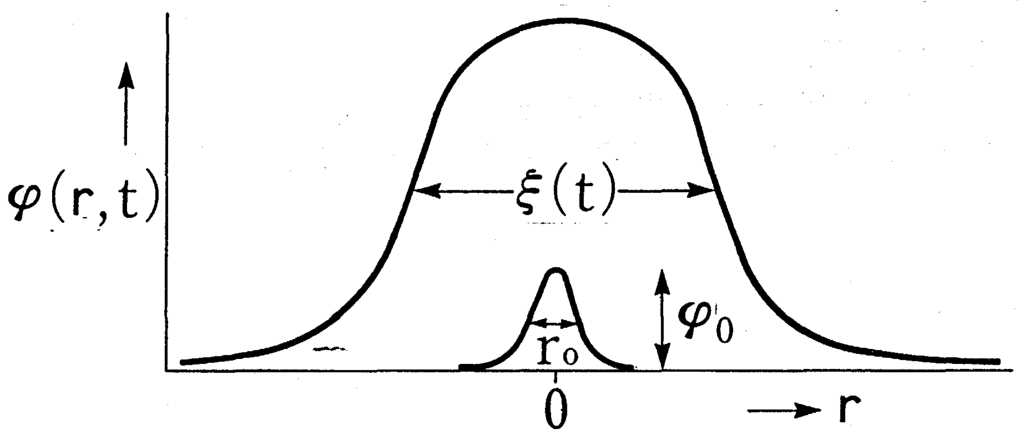
3、非一様な系におけるマルチ・スケーリング理論

非一様な系を扱うには、次のTDGL方程式[11]

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = D\nabla^2\varphi(\mathbf{r},t)+\gamma\varphi(\mathbf{r},t)+N(\varphi(\mathbf{r},t))+\eta(\mathbf{r},t) \tag{3、1}$$

で考えると便利である。但し、$N(\varphi(\mathbf{r},t))$ は $\varphi(\mathbf{r},t)$ の非線型項を表わす。初期の $\varphi(\mathbf{r},0)$ は、第1図のように、$\mathbf{r}=0$ のまわりに幅 r_0 を持つ、大きさ φ_0 のガウス

第1図



分布をしていたとする。もっと理想的に、（或いは、近似的に）

$$\varphi(\mathbf{r},0) = \varphi_0(\mathbf{r}) = \varphi_0\,\delta\!\left(\frac{\mathbf{r}}{r_0}\right) \tag{3、2}$$

としてもよい。このとき、（2、6）のスケーリング極限を拡張して、次のマルチ・スケーリング極限を考える：

$$\begin{cases} t\to\infty\ , & \varepsilon\to 0\ ; \quad \varepsilon e^{2\gamma t} = 一定\ , \\ \varphi_0\to 0\ ; & \qquad\quad\ \varphi_0 e^{\gamma t} = 一定\ , \\ r\to\infty\ ; & \qquad\quad\ r^2/t = 一定\ , \\ r_0\to\infty\ ; & \qquad\quad\ r_0^2/t = 一定\ . \end{cases} \tag{3、3}$$

このとき、次のマルチ・スケーリング則が成立することが示される[4]：

$$\langle\varphi(\mathbf{r},t)\rangle = \langle\varphi\rangle_{st}\, f^{(sc)}\!\left(\varepsilon e^{2\gamma t}, \varphi_0 e^{\gamma t}, \frac{r^2}{t}, \frac{r_0^2}{t}\right). \tag{3、4}$$

このスケーリング則は厳密に解ける模型では具体的に確かめられている。[4] 初期条件がもっと複雑で、$t\to\infty$ で $\varphi(\mathbf{r})$ がカオチックになるような場合については現在研究中であり、近く発表する予定である。

また、実験との関係の議論も次の機会に譲る。

参考文献

1) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Stat. Phys. 9 (1973), 51.

2) N.G. van Kampen, Adv. Chem. Phys. 34 (1976), 245.

3) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), 1657.

4) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. Suppl. 79 (1984), in press.

5) 甲斐昌一，この報告.

6) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 56 (1976), 77, 477.

7) M. Suzuki, Adv. Chem. Phys. 46 (1981), 195.

8) M. Suzuki, J. Stat. Phys. 16 (1977), 11.

9) M. Suzuki, J. Math. Phys. March (1985).

10) M. Suzuki, T. Tsuno and Y. Liu, Prog. Theor. Phys.

11) K. Kawasaki, M.C. Yalabik and J.D. Gunton, Phys. Rev. 17 (1978), 455.